熱力学の論理と動的システム

佐々真一[1]

1 はじめに

1.1 基本問題

２０世紀、科学の最先端の発見が、人類の生活を大きく変えた。桁はずれに巨大なエネルギーを生み出す原子力が、安定な制御の問題を抱えたまま、社会に組み込まれたのは、その典型である。より身近には、インターネットや携帯電話など、半導体技術にもとづく情報機器の普及により、コミュニケーションの様式がかわってきた。人類が実際に地球を離れることも、もはや、トップニュースの扱いではなく、特別な訓練をうけていない人の宇宙旅行が実現するのも遠くないかもしれない。このように、かってフィクションだった話が、次々と現実化してくると、科学の力によって、「できないことはない」という錯覚におちいるかもしれない。

未来にありうるかもしれない科学の成果としてもっとも衝撃的なのは、生命の制御だろう。クローン技術や遺伝子解読など生物学の最先端の進歩の延長上に、不死や蘇生技術を想像するのは突飛なことではない。生物は、いつかは死ぬ。そして、死んだ生物を生き返らせることはできない。現在、誰もが知っている、この素朴な事実は、倫理的にも、科学的にも、生命を位置づける上で、もっとも基本的なことである。その基本的な事実を科学の発展によって書き直すことができるのだろうか。

不死や蘇生ほど極端なものでなくても、人類は、自然な変化の向きに逆らうように、「近代化」とよばれる様式をすすめてきた。夏になると暑くなり、汗だくになるはずなのに、寒気を感じるほどにクーラーを効かせている空間がある。その空間にとっては、クーラーのスイッチをいれて、温度を下げたにすぎない。しかし、そうすることによって、その空間以外のところでは、空気がにごり、温度があがっている。自然の１部に何か無理なことをすると、その外側に負担を与えている、ということはないのだろうか。

これらの素朴な疑問を一般化すると、次のように表現される基礎科学の問いになる。

(基本問題) 自然に対して、何ができて、何ができないのか。その境界はどのように決まるのか。あるいは、自然の一部に対して何かをするためには、他の部分にどのような代償を払わないといけないのか。

1.2 熱力学

基本問題を考えていく上で、忘れてはならないのが、１９世紀に確立した熱力学[1]である。熱力学には、二つの側面がある。第１に、物質の熱力学的性質(状態方程式や熱容量)をエントロピーによって統合すること。その結果、微視的なモデルからエントロピーを計算する形式（統計力学）によって、物質の性質を微視的な視点から議論できる。第２の側面は、可能な状態変化に対する本質的な制限を体系化することである。断熱環境での平衡状態間の変化において、エントロピーを減少する操作ができない、というエントロピー増大則は、その代表例である。

[1] 東大総合文化研究科、sasa@jiro.c.u-tokyo.ac.jp, http://dbs.c.u-tokyo.ac.jp/~sasa/sasa/

これらのふたつの側面の両方に、エントロピーが表れる。それゆえに、平衡状態間の変化に対する本質的な制限が、物質の熱力学的性質によって表現できる。

熱力学の第2の側面と先に掲げた基本問題との類似性に注目したい。熱力学は、その対象を平衡状態間の変化に限定し、基本問題のひとつの解答を与えているのである。熱力学の知見を踏まえると、基本問題に対する解答は、(平衡状態遷移とは限らない) 対象群に対して「できないこと」の数学的な表現を見出すことによってあたえられるだろう。

生物系や地球系などを念頭において、外界と物質やエネルギーをやりとりしつづけて維持される動的な非平衡状態を、熱力学的な考え方で議論することは、新しいことではない。例えば、「エントロピーを捨てることによって、非平衡状態を維持する」、という常套句を思い出す読者がいるかもしれない。しかし、その言葉に、熱力学を超えた深い意味や見方があるわけではなく、19世紀の熱力学の枠内からでるものではない。ここで考えたいのは、既存の熱力学の応用ではなく、熱力学的な対象から離れたところに「できないこと」を体系化しうるのか、という科学として新しい問題を考えたい。

1.3 研究のすすめかた

このような問題を考えるとき、三つの研究戦略がありえる。第一に考えられるは、具体的で典型的な現象を定め、その動力学モデルをデザインし、それに対する操作限界の表現を見出す試みである。例えば、外から操作可能な物質濃度をもった化学反応ネットワークに対し、ネットワークとしての活性度の制御がどの程度可能なのか、という問題設定ができる。この問題は、生物の生死の問題と関係する部分がすくなからずあるだろう。また、生物実験との関係では、細胞分化の理解や制御との関係があると思われる。このようなモデル研究から数理的な指標に到達すれば、楽しいだろうが、残念ながら、筆者はこのような問題意識での化学反応ネット系の具体的なモデルデザインに至っていない。

第2の研究戦略として、抽象的な力学系の研究で操作限界の指標を見出す試みが考えられる。そのためには、熱力学極限で熱力学と対応することが確実であるハミルトン力学系から考察するのがよいだろう。有限自由度ハミルトン力学系に対し操作限界の指標を見出すことができれば、その量を力学系として抽象化していくことが可能になると期待できる。この操作限界の指標は熱力学極限では熱力学エントロピーと一致しているはずなので、操作限界の指標を適当に与えることは許されず、そのような量が力学系固有な量として存在することは、理論的にはほとんど奇跡的にも思える。この研究についてはある程度まで進展しているが、[2] ここでは議論しない。

第3の研究戦略は、熱力学法則の公理を徹底的に絞りこみ、熱力学と切り離した抽象的なかたちで、「できないこと」の数学的な表現としてのエントロピーを定式化を出発点にすることである。近年、Lieb-Yngvason によって公理論的熱力学は究極的ともいえるレベルまで整理された [3]。したがって、この公理系をみたすモデルとして平衡熱力学以外のものを見出すことができれば、「できないこと」の体系化にむけて前進するだろう。筆者の知る限り、Lieb-Yngvason の公理系をみたす非自明モデルが存在することは具体的に示されていない。しかし、近い将来、色々な問題との関連が議論されてくるだろう。そこで、講演では、Lieb-Yngvason の公理系のレビューに重点をおいた。この報告書では、Lieb-Yngvason の公理論的熱力学のうち、熱力学と無関係に操作限界から抽象的エントロピーが定式化されるまでをスケッチする。

2　公理論的熱力学

2.1　設定

状態空間: 箱の中に物質Aが物質量Nだけ封入されているとき、その系がとりうる平衡状態の集まりをΓとかく。物質の種類や物質量に応じて、Γ_1, Γ_2のように異なる状態空間を考える。また、Γ_1とΓ_2に対応する箱をふたつ並べた配置に対応する状態空間を$\Gamma_1 \times \Gamma_2$と直積で表現する。状態空間Γに対応する系をλ倍に相似拡大して得られる系の状態空間をΓ^λとかく。この相似拡大では、物質の種類は不変だが物質量はλ倍されている。

状態: $X \in \Gamma$, $(X,Y) \in \Gamma_1 \times \Gamma_2$, $\lambda X \in \Gamma^\lambda$というように、各々の状態空間の要素を記す。例えば、$X = (U,V)$というように、(内部)エネルギーと体積で平衡状態を表現すると考えてよい。

断熱過程の公理: $X \to Y$を「状態Xから状態Yへ断熱過程で到達できる」と読む。箱の中の流体を対象にする場合には、ピストンをがちゃがちゃ動かして平衡状態から別の平衡状態へ遷移させることに対応する。$X \to Y$かつ$Y \to X$のとき$X \leftrightarrow Y$とかく。$X \leftrightarrow Y$がなりたつときの$X \to Y$を可逆過程とよぶので、$X \leftrightarrow Y$を「状態Xから状態Yへ可逆過程で到達できる」と読む。$X \to Y$は次の6つの公理をみたす。

1. $X \leftrightarrow X$
2. $X \to Y, Y \to Z \ \Rightarrow \ X \to Z$
3. $X \to X'$, $Y \to Y' \ \Rightarrow \ (X,X) \to (Y,Y')$
4. $\lambda > 0$, $X \to Y \ \Rightarrow \ \lambda X \to \lambda Y$
5. $X \to ((1-\lambda)X, \lambda X)$
6. $(X, \epsilon Z_0) \to (Y, \epsilon Z_1)$ $\epsilon \searrow 0$ for some Z_0, $Z_1 \ \Rightarrow \ X \to Y$

注: 最後の公理を除いて、物理的には自明なことを公理として書いている。最後の公理は「安定性の公理」とよばれ、言葉でよむともっともらしく思える。物理として熱力学を議論をするとき、安定性の公理を前にだすことはない。しかし、安定性の公理を使って導かれる次の補題は、物理の議論だけで考えると悩むところだが、安定性の公理を認めれば悩まなくてよいというのは(少し)嬉しい。

補題1: $(X,Z) \to (Y,Z) \ \Rightarrow \ X \to Y$

注: 断熱過程を公理で縛るだけでは「熱力学」は演繹されない。カラテオドリ的に馴じんでいる人はこれらの公理をみて、「熱力学」にとって大事でないところを公理化しているではないか!と怒るかもしれない。ここまでは土台設定であり、「熱力学」にとって大事な部分は次のふたつの仮定にある。以下の議論ではこのふたつを前提にして議論をすすめる。

(比較仮説): ふたつの状態X, Yについて、$X \to Y$か$X \leftarrow Y$の少なくともひとつはなりたつ。

(不可逆過程の存在): $X_0 \to X_1$, $X_1 \not\to X_0$をみたすX_0, X_1が存在する。

注: 物理の議論では、プランクの原理: $(U,V) \to (U',V) \ \Leftrightarrow \ U' \geq U$を前提にして形式化の出発点にとればよい。(第2種永久機関の非存在とくらべても感覚的にわかりやすい。) これによ

り、不可逆過程の存在は保証される。比較仮説を物理的な要請として言い替えることは簡単ではない。断熱準静的過程という特別な過程を物理的に定義し、それに対する条件とプランクの原理を組み合わせれば比較仮説を導くことはできる。したがって普通の物理の教科書風にこの節を書き直すこともできる。(逆に、公理論の立場で形式化するとき、断熱準静的過程をエントロピーより前に出すのは難しいと思う。)

2.2 状態空間の順序構造

$X_0 \to X_1$, $X_1 \not\to X_0$ をみたす X_0, $X_1 \in \Gamma$ を固定する。
定義: $X_\lambda = ((1-\lambda)X_0, \lambda X_1)$

注: $0 \le \lambda \le 1$ 以外には自然な拡張を考えるものとする。物理的には、状態 X_0 の箱から $1-\lambda$ 倍の領域をとりだし、状態 X_1 の箱から λ 倍の領域をとりだし、横に並べた状態を定義したにすぎない。この状態が重要なのは次の補題が成立するからである。

補題 2: 任意の $X \in \Gamma$ に対して、$X \leftrightarrow X_\lambda$ となる λ は唯一にきまる。

注: 最初 L-Y 論文を読んだとき、この補題の物理的な対応がわからなくて神秘的に思った。安定性の公理のかわりに、断熱準静的過程の物理的な知見で、補題 2 を示そうとしたのだが、なかなかできなかった。佐藤勝彦氏が理想気体の例題で補題 2 の物理的な視点での説明を与えた。このことが熱力学の本 [1] の構成にも大きな影響をあたえた。

補題 3: $X_\lambda \to X_\mu \ \Rightarrow \ \lambda \le \mu$

注: 補題 3 はプランクの原理に対応する。

2.3 エントロピー

定理 (エントロピー原理): 任意の実数 α に対して、
$((1-\alpha)X, \alpha Y) \to ((1-\alpha)X', \alpha Y') \ \Leftrightarrow \ (1-\alpha)S(X) + \alpha S(Y) \le (1-\alpha)S(X') + \alpha S(Y')$
をみたす Γ 上の関数 $S(X)$ は、$S(X) = a\lambda + b$, $X \leftrightarrow X_\lambda$ とかける。ここで、$a > 0$, b は任意定数である。

注:この S をエントロピーとよぶ。a は尺度のとりかたの任意性、b は基準の選び方の任意性だから、複合状態間の断熱過程が可能なための必要十分条件をあたえる量として本質的に一意的にきまる量がエントロピーである。

注: Γ 上で定義された関数 S は $\Gamma_1 \times \Gamma_2$ や Γ^λ に自然に拡張できる。

$$S(X,Y) = S(X) + S(Y) \tag{1}$$
$$S(\lambda X) = \lambda S(X) \tag{2}$$

このようにして異なる状態空間で定義されたエントロピー目盛を標準化することにより、エントロピー原理を拡張することができる。(ただし、化学反応や混合がおこったときは面倒である。)

3 おわりに

定理 (エントロピー原理) できまったエントロピーは抽象的なものである。公理論的熱力学を完成させるには、このあと抽象的エントロピーをもちいて温度などの概念の定式化をしなければならない。大雑把にいうと、熱的接触や力学的接触に関する公理を加え、熱力学の変分原理がこのエントロピーによって表現できることを確認すればよい。具体的には文献[3] を参照。

この公理論に関して筆者が興味をもっているのは、断熱操作の公理系からきまった抽象的なエントロピーが熱力学エントロピー以外の量と関係するのかどうかである。例えば、Kolmogorov complxity や Shannon 情報量をL-Y の公理系から位置付けることができないのだろうか? ランダムネス、情報、熱力学の関係については、歴史的にも様々な議論をされているが、[4] 深いレベルでの考察には至っていないように思える。筆者の意見では、これらの考察では熱力学に関する理解が甘すぎると感じている。熱力学をL-Y 公理系でとらえた上で、ランダムネスや情報との接点に切り込んでいくことは遠くない問題であろう。

参考文献

[1] 佐々真一、熱力学入門、(共立出版); 田崎 晴明、熱力学、(培風館)

[2] S. Sasa and T. S. Komatsu, Phys. Rev. Lett. **82**, 912, (1999); S. Sasa and T. S. Komatsu, Prog. Theor. Phys. **103**, 1, (2000); S. Sasa, http://xxx.yukawa.kyoto-u.ac.jp/abs/nlin.CD/0006042.

[3] E. Lieb and J. Yngvason, Phys. Rep. **310** 1 (1999); http://xxx.yukawa.kyoto-u.ac.jp/abs/cond-mat/9708200

[4] M. Li and P. Vitányi, An introduction to Kolmogorov complexity and its applications, (Springer, 1993).